

炭素材料のプラズマ反応素過程の分子シミュレーション

Molecular Simulation for Plasma Elementary Processes of Carbon Material

核融合研¹, 名大院工² ○伊藤 篤史¹, 高山 有道¹, 中村 浩章^{1,2}

NIFS¹, Nagoya Univ.², °Atsushi M. Ito¹, Arimichi Takayama¹, Hiroaki Nakamura^{1,2}

E-mail: ito.atsushi@nifs.ac.jp

プラズマと固体材料物質の相互作用現象は、物質表面にナノメートルからマイクロメートルスケールの形状変化を引き起こす。気固界面と比べてプラズマ特有の興味深い点は、高い入射エネルギーにより材料内部への侵入率が非常に高くなることから、照射下における材料中の不純物濃度が高い状態にあるということである。また、化学における一般的な反応チャンネル以外の反応が強制的に起こされているともとれる。

我々の研究は、磁場閉じ込め核融合装置の炉内壁においてプラズマと接触・シールドする第一壁およびダイバータと呼ばれる材料表面の現象を、分子スケールのシミュレーションを駆使して解明することである。国際熱核融合実験炉 ITER の建設が本格化する 2010 年以前は、ダイバータに使われる材料はカーボンファイバー系の炭素材料が主流であった。核融合分野における課題としては、水素プラズマの飛来による炭素材料表面の化学損耗を抑制することと、そこから放出される炭化水素分子が炉内の別の場所に再堆積する問題の解決であった。これらの課題は、入射エネルギーも入射フラックスも応用プラズマにおける実験室実験とほとんど同じスケールであり、ダイヤモンドライクカーボン(DLC)の形成過程など、核融合分野と応用プラズマ分野の関連研究が展開できた。一方で、当時のシミュレーション研究は分子動力学を単体で用いる事しかされておらず、現実のプラズマ照射下環境を十分に模擬できているとは言えないものであった。

現在は核融合炉におけるダイバータや第一壁にはタングステン材料を使うことがほぼ一本化され、炭素を始めとする応用プラズマ研究とは距離ができたように見える。一方で、この 10 年弱でシミュレーション技術は大きく向上した。分子動力学・密度汎関数理論・動的モンテカルロ・二体衝突近似、およびそれらのハイブリッド手法を開発したことで、分子動力学を単体で用いるだけでは再現できなかった、秒から分といった長時間スケールに及ぶプラズマ照射の再現が可能となってきた[1]。長時間スケールの再現によってプラズマ粒子の飛来頻度と、材料内部の現象の速度（反応速度など）との現実的な競争を考えることができるようになってきた。

本講演では、これまでの炭素研究と最近のタングステン研究を踏まえ、プラズマ照射下における炭素材の分子シミュレーションの今後の展望を議論したい。特に以下を取り上げる：

- ・ 化学スパッタリングと堆積に見る分子動力学の限界
- ・ タングステン繊維状ナノ構造を例にしたプラズマ照射頻度と材料内部の現象の競争[1]
- ・ アモルファス炭素堆積およびプラズマプロセス過程の難しさと分子シミュレーション手法開発による展望

[1] A. M. Ito, A. Takayama, and H. Nakamura, Plasma and Fusion Research, **13** (2018) 3403061.